



TITLE:

有機微粉末結晶のab initio結晶構造解析

AUTHOR(S):

津江, 広人

CITATION:

津江, 広人. 有機微粉末結晶のab initio結晶構造解析. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2014, 2013: 119-119

ISSUE DATE:

2014-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/186358>

RIGHT:

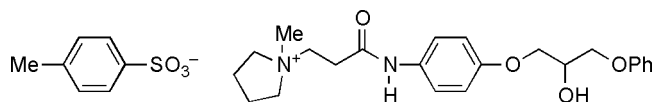
有機微粉末結晶の *ab initio* 結晶構造解析

Ab initio crystallography of organic crystalline powder

人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座 津江 広人

背景と目的

すべての生物は、外来分子のキラリティーに対して敏感に反応することから、医薬品、農薬、食品、香料を扱う分野で、純鏡像体に対する需要が高まっている。既知の結晶性のラセミ体のうち、ラセミ混合物として存在するものは全体の 10% 未満であり、残り 90% 以上はラセミ結晶として存在する。前者については、優先晶出法を用いて光学分割が可能である一方、後者については、単純な再結晶による光学分割は原理的に不可能と考えられてきた。近年見出された優先富化現象¹は、ラセミ結晶の光学分割を可能とする新規光学分割法であることから、そのメカニズムを解明することは大変に重要である。しかし、優先富化現象を示す PyrTMe-OPh のラセミ体を有機溶媒から再結晶して得られる結晶は、微粉末結晶として得られるため、粉末 X 線回折データからの結晶構造解析が必須となる。そこで本研究では、PyrTMe-OPh の放射光粉末 X 線回折データを測定し、結晶構造の解析を試みた。



PyrTMe-OPh

検討内容

ラセミ体の PyrTMe-OPh の粉末 X 線回折パターンは、SPring-8 のビームライン BL02B2 にて測定した。次いで、ソフトウェア Materials Studio のモジュール Reflex+を用いて、X-Cell により指数付けと空間群の決定を行った後、Pawley 法により格子定数を精密化した。現在、Powder Solve を用いて初期構造の探索を行っているところである。

結果と考察

PyrTMe-OPh の微粉末結晶については、実験室系の粉末 X 線回折装置を用いて回折パターンを測定したが、指数付けさえ行うことができなかった。しかし、今回、放射光を用いて粉末 X 線回折測定を行ったことにより、粉末 X 線回折データから指数付けを行うことができた。得られた格子定数は、 $a = 12.0714 \text{ \AA}$, $b = 16.2280 \text{ \AA}$, $c = 14.6148 \text{ \AA}$, $\beta = 91.43^\circ$ であり、空間群は $P2_1/c$ と決定された。現在、PyrTMe-OPh が示す優先富化現象の発現メカニズムを解明するため、その結晶構造解析を進めているところである。

発表論文

なし

参考文献

[1] Tamura, R.; Takahashi, H. Fuimoto, D.; Ushio, T. *Top. Curr. Chem.* **2007**, 269, 53.